

しも空間的配置に基くものである必要はない。こういう視点は、対象系だけを扱っているつもりの前節の話でも、そのstate-observableに関する議論が示すように、実は量子論の一番基本的な概念設定の所にまで忍び込んでいるものであり、町田・並木・荒木理論での観測過程=波束の収縮の議論にも勿論、この問題は密接に絡んでいる。既に述べた《bundle構造, local $\leftrightarrow$ global ( $\Rightarrow$ 紫外 $\leftrightarrow$ 赤外)》, 《個別的構造 $\leftrightarrow$ 分類空間 (=構造の分類指標が形成する高次構造)》という視点と併せて, 《subsystem  $\xrightleftharpoons[\text{条件は期待値埋込み}]{}$  total system》というこの図式も, 階層移行を記述する有力な概念装置の候補の一つだろう。これらは多分別々のものではなく, 相互に深く結びついており, 然るべき具体例に即して, その相互関係を掘り下げること, 何れは有用になるのではなからうか?

## 文 献

- [1] P. Nelson & L. Alvarez-Gaumé, *Comm. Math. Phys.* **99**, 103 (1985)。
- [2] 並木美喜雄, マクロ系の量子力学と観測問題 [物理学最前線 10 (共立出版) 所収] 及びそこに引用された文献を参照のこと。
- [3] 柳瀬睦男, 現代物理学と新しい世界像 (岩波書店)。
- [4] 梅垣寿春・大矢雅則・日合文雄, 作用素代数入門 (共立出版); O. Bratteli & D. W. Robinson, *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics, I* (Springer)。
- [5] I. Ojima, preprint RIMS-532 (1986) (to appear in *Z. f. Physik C*)。
- [6] H. Araki, *ETH Lectures (Einführung in die axiomatische Quantenfeld theorie I)* 1961/62 を参照のこと。
- [7] H. Narnhofer, M. Requardt & W. Thirring, *Comm. Math. Phys.* **92**, 247 (1983)。

## 確率過程の方法による非平衡熱力学

京大・理 長谷川 洋

### § 1. 序

非平衡熱力学に関する昔からのテーマは「エントロピー生成 (entropy production)」の問題である。これは文字通り現象論としての熱力学に出現し, これまで統計力学的にその基礎を与えようとする努力がなされながらも決して成功を収めたとはいえない非平衡系に関する基本問題の一つである。'60年代初頭までの結果はde Groot-Mazurの教科書<sup>1</sup>によくまとめられており, 確率過程の方法がこの問題に有効なものであることが示唆されている。一方, 確率過程の数学的手段は70年代以降量子確率過程をも含め著しい発展を遂げていることが認められ, これを駆使して問題に光を当てることは有意義なものがある。

'60年代から'70年代にかけてエントロピー生成概念を非平衡系の研究の道具立てに用いたのはI. Prigogineとそのスクールであった。その将来への展望は巨視的体系が'かたち'を形成する法則を集大成しようとするもので, 彼がその書<sup>2</sup>において「散逸構造 (dissipative structure)」と呼んだ自然の秩序形

成の法則化への指向であり、平易な言葉での「自己組織化 (self-organization)」と同義概念であると考えられる。ここでは、素朴な熱力学概念としてのエントロピー生成について Prigogine が述べたことを要約し、ついでこれを精密概念に高めようとしてなされた諸研究と未だ解明されていない諸問題点を解説する。

## §2. 熱力学概念としてのエントロピー生成

巨視的系を特徴付ける示量性状態量エントロピーの巨視的 (時間) 変動を次のように表す：

$$dS = d_e S + d_i S \quad (1)$$

それは系が外部 (環境と呼ぶ) に接触している開放系であり、全変動  $dS$  は系の内部的変動  $d_i S$  と外部との交渉による変動  $d_e S$  とに分解されることを示している。(通例、開放系とは環境との間に物質の交換—質量交換—のある巨視系に対し与えられる名称である<sup>1</sup>が。ここではより広く (熱交換だけの場合も含め) この言葉を用いることにする。) 内部的変動は系の状態を指定する巨視変数  $x_\alpha$  ( $\alpha = 1, 2, \dots$ ) の時間発展のみによって定められ、それらは熱力学第二法則に従う不可逆過程であるとする： $d_i S (x_1, x_2, \dots) = \sum_\alpha \frac{\partial S}{\partial x_\alpha} dx_\alpha \geq 0$ 。このとき単位時間あたりのエントロピー内部変化  $\frac{d_i S}{dt}$  をもってエントロピー生成と定義し  $P$  で表すことにすれば

$$P (= P (x_1, x_2, \dots)) = \sum_\alpha J_\alpha X_\alpha \quad (2)$$

ただし  $J_\alpha = \frac{dx_\alpha}{dt}$  : 状態変数  $x_\alpha$  の時間微分 (速度) —  $x_\alpha$  の '流れ (flux)'

$$X_\alpha = \frac{\partial S}{\partial x_\alpha} : \text{流れ } J_\alpha \text{ を生ずる内的力—一般化された熱力学力 (force)}$$

と呼ばれている。Prigogine によって述べられたエントロピー生成  $P$  の性質は概略以下のようにまとめられる<sup>3</sup>：

- I.  $P \geq 0$  そして  $P = 0$  は (熱的) 平衡状態を意味する。
- II.  $\min P$  ( $P$  を極小にする状態) は定常状態を意味する。従って、勿論熱平衡状態は定常状態の一種であるが、逆は真でない。熱平衡と異なる定常状態は  $P > 0$  であって且つ極小の  $P$  を与える状態ということになる。
- III. しばしば  $\sum_\alpha J_\alpha \frac{dX_\alpha}{dt} \leq 0$  という不等式が成立することが認められる。これを法則化し、次の不等式として「時間発展規準 (evolution criterion)」と呼んだ： $d_X P = \sum_\alpha J_\alpha dX_\alpha \leq 0$  (Glansdorff-Prigogine) これは  $P (x_1, x_2, \dots)$  の全微分を表すものではない。しかしながら線形不可逆過程  $J_\alpha = \sum_\beta L_{\alpha\beta} X_\beta$  の範囲で Onsager の相反定理<sup>4</sup> (磁場性の外力のない場合  $L_{\beta\alpha} = L_{\alpha\beta}$  が成立つならば  $d\mathbf{J} = L d\mathbf{X}$  従って  $d_J P = d\mathbf{J} \cdot \mathbf{X} = (L d\mathbf{X}) \cdot \mathbf{X} = (L\mathbf{X}) \cdot d\mathbf{X} = \mathbf{J} \cdot d\mathbf{X} = d_X P$  であるから  $dP$  (全微分)  $= 2 d_X P \leq 0$  となって上述の不等式は  $P$  の時間変化に関する不等式として成立する。線形不可逆過程は平衡状態に近接した状況での不可逆過程と考えられ、安定な定常状態を意味するから、G-P の主張は一般に次のように理解されよう。

Ⅲ'.  $\frac{dP}{dt} < 0$  は系の安定な時間発展の一規準である。

**筆者補注** アンサンブルの概念を含まない熱力学の枠組では、以上の説はすべて少数の熱力学変数の関数群に関する等式・不等式として述べられている。(ただし一般には空間的に一様でない体系を想定して、これらの変数は時間とともに空間変数によると考えられ、それらの密度関数によって時空のバランス方程式が設定される。以下では空間的に一様な場合に限定する。) Prigogineらの主要な目標は上述のⅠ, Ⅱ, Ⅲ'を非線形不可逆過程にまで拡張しようとするものであったが、分布概念を用いての統計力学的基礎付けの問題とともに現在確実な理解は得られていないと考えられる。そのうち一つの興味ある試みはG-P不等式  $d_X P = \sum_{\alpha} J_{\alpha} dX_{\alpha} \leq 0$  を非線形不可逆過程にまで拡張してⅢ'に結び付けようとする一柳氏の考察(私信およびこの報告の後の氏の記述)である: もし適当なスカラー関数  $\Psi(X_1, X_2, \dots)$  があって  $J_{\alpha} = \frac{\partial \Psi}{\partial X_{\alpha}}$  が成立すれば  $d_X P = d\Psi$  のように全微分となり  $\Psi$  の時間発展に関する符号の法則化が得られることになる。そのためには  $\frac{\partial J_{\alpha}}{\partial X_{\beta}} = \frac{\partial J_{\beta}}{\partial X_{\alpha}}$  が必要であるが、これが非線形 Onsager 相反定理とみなさるべき関係である。これを有効に体系化するためには熱力学変数を状態変数  $\{x_{\alpha}\}$  から  $\{X_{\alpha}\}$  又は  $\{J_{\alpha}\}$  に変更する手続きを確立しなければならない。線形の範囲でこれを具体的に示したのが Onsager-Machlup理論<sup>5</sup> である。それによれば、二種類の二次形式散逸関数  $\Phi(\mathbf{J}, \mathbf{J})$  および  $\Psi(\mathbf{X}, \mathbf{X})$  がガウス過程  $\mathbf{x}(t)$  に対し定義され、定常過程のもとで  $\mathbf{J} = \mathbf{L}\mathbf{X}$  および  $\Phi(\mathbf{J}, \mathbf{J}) = \Psi(\mathbf{X}, \mathbf{X})$  が成り立つ(一般の非定常過程では  $\mathbf{J}$  と  $\mathbf{X}$  とは互いに独立) ような遷移確率に対する最大値原理を証明することが出来て、それが線形不可逆過程でのエントロピー生成極小 — 正確には散逸極小 — 原理となる(その際  $\frac{dS}{dt} = \Phi + \Psi = 2\Psi(\mathbf{X}, \mathbf{X}) > 0$  が成立する)。一柳氏の提案はこれを非線形の場合に拡張しようというもので、一般に二次以上の散逸関数  $\Phi(\mathbf{J})$  と  $\Psi(\mathbf{X})$  とを想定し、その間の Legendre 変換を引き起す変分原理から非線形 Onsager 関係式  $J_{\alpha} = \frac{\partial \Psi}{\partial X_{\alpha}}$  を導こうとするものである(§5 参照)。

### §3. 情報量を用いた「エントロピー生成」定義付けの問題

‘エントロピー生成’以前に、‘エントロピー’自体を情報量として論ずる仕事は巨大なものがある(最近の成書として梅垣・大矢<sup>6</sup>がある)。ここでは簡単に有限系に対して要約する。

#### 3.1 Kullback 情報量およびその‘量子化’としての相対エントロピー

N個の状態  $i=1, 2, \dots, N$  に対して定義された系の集団が確率分布  $\{p_i; i=1, \dots, N\}$  によって記述されるとき、その系のもち得る情報の大小を計る Kullback 情報量:  $p = \{p_i\}$ ,  $\bar{p} = \{\bar{p}_i\}$  に対し  $K(p, \bar{p}) = \sum_{i=1}^N p_i (\log p_i - \log \bar{p}_i)$ ;  $\sum p_i = \sum \bar{p}_i = 1$

(1)  $K(p, \bar{p}) \geq 0$ , 等号は  $p = \bar{p}$  (i.e.  $p_i = \bar{p}_i$   $i=1, 2, \dots, N$ ) のみ

(2)  $p$  に対する凸性  $K(\lambda_1 p_1 + \lambda_2 p_2, \bar{p}) \leq \lambda_1 K(p_1, \bar{p}) + \lambda_2 K(p_2, \bar{p})$   
( $0 \leq \lambda_1, \lambda_2$   $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$ ; 等号は  $\lambda_1 = 0$  又は  $\lambda_2 = 0$ )

(3) 同次正直写像に対する非増加  $p \rightarrow p' = Ap$ ,  $\bar{p} \rightarrow \bar{p}' = A\bar{p}$  (ただし  $A_{ij} \geq 0$ ,  $\sum_i A_{ij} = 1$ )  
 $K(Ap, A\bar{p}) \leq K(p, \bar{p})$

量子力学系はヒルバート空間の上の有界作用素全体が作る  $C^*$ -代数やその部分代数としての von Neumann 代数によって記述され、確率  $p_i$  に相当するものは狭い意味で密度行列  $\rho$  一般には‘状態’(正直汎関

研究会報告

数)である。上述の有限系には $N \times N$ 複素行列全体の作る非可換代数が対応し「 $N$ -準位原子のモデル」と呼ばれて扱われて来た。このとき $K(\rho, \bar{\rho}) = \text{tr} \rho (\log \rho - \log \bar{\rho})$ であって

- (1)  $K(\rho, \bar{\rho}) \geq 0$ , 等号は $\rho = \bar{\rho}$ のみ
- (2)  $\rho$ に対する凸性(古典(可換の場合)と同じ)
- (3)  $K(A\rho, A\bar{\rho}) \leq K(\rho, \bar{\rho})$  ( $A$ は $\text{Tr} A\rho = \text{Tr} \rho$ を満す完全正值写像<sup>注)</sup>)

を満足する。<sup>7</sup>(注. 一般に $X \geq 0$ に対し $AX \geq 0$ を満す $A$ は正值写像と呼ばれるが, 非可換代数上で上の性質(3)を満そうとするならばこの意味の正值性だけでは不十分でより強い完全正值性が必要とされる: 一般に(無限次元) $C^*$ -代数 $\mathfrak{A}$ の上の完全正值写像 $A$ とは $\mathfrak{A}$ とともに任意の $n \times n$ 行列代数 $\mathfrak{A}_n$ との直積 $\mathfrak{A} \otimes \mathfrak{A}_n$  ( $n = 0, 1, 2, \dots$ )に対して $\tilde{A}(\tilde{X}_n) \geq 0, \tilde{X}_n (\in \mathfrak{A} \otimes \mathfrak{A}_n) \geq 0$ , が成立する写像である。)

3.2 相対エントロピーの時間微分としてのエントロピー生成

以上から知られるように, 二つの確率分布 $p$ と $\bar{p}$ との間の‘遠近’を測る量が $K(p, \bar{p})$ であり,  $p$ が $\bar{p}$ に時間的に接近するレートをもって $p$ という状態にある系のエントロピー生成を定義すればよいであろうと誰しも考える。今正值写像 $p \rightarrow A^t p$  ( $A_{ij} \geq 0, \sum_i A_{ij} = 1$ )がマルコフ鎖( $A = A^t; A^t \cdot A^s = A^{t+s}, A^{t=0} = 1, \|A^t\| \leq 1$ を満すマルコフ半群)をなすとすると,  $t \rightarrow \infty$ で $p$ は定常分布(一般には一つとは限らない)に向かいそのような定常分布を $\bar{p}$ とすれば $-\frac{d}{dt} K(A^t p, \bar{p}) \geq 0$ が保証される。これが云わゆるH-定理であって, マルコフ鎖以外にも拡散過程<sup>8</sup>や量子力学半群<sup>9</sup>に対し証明されている。 $-\frac{d}{dt} K(A^t p, \bar{p})$ をもって系のエントロピー生成とみなしこれからG-P不等式IIIを導くことを最初に論じたのはSchrögl<sup>10</sup>と思われる。それは $K(p(t), \bar{p})$ が一種のリヤプノフ関数になっているという認識に基いている。次に論ずるようにこの考えが正しいのはマルコフ過程によって近接する状態 $\bar{p}$ が熱平衡状態の場合であって, そうでなければ一般には「エントロピー生成」概念の資格を欠いているのである。

3.3 相対エントロピー時間微分としてのエントロピー生成の適否

系の時間発展がマルコフ過程で記述されることを許容するにしても, それをもって直ちに $P = -\frac{d}{dt} K(p^t, \bar{p})$ とすることにはならない。その理由はPrigogineの‘axiom’Iを考えれば明らかである。ここでは $P$ は時間変化する分布 $p^t = A^t p_{t=0}$ および定常分布 $\bar{p} = \lim_{t \rightarrow \infty} A^t p_{t=0}$  ( $A^t \bar{p} = \bar{p}$ )の同次汎関数となっているので

$$P = P(p, \bar{p}) \tag{3}$$

$$\text{と書くことにすると } P(p = \bar{p}, \bar{p}) = 0. \tag{3}'$$

すなわち $\bar{p}$ が定常分布であるということだけでエントロピー生成は $p = \bar{p}$ において常に最小値0を取るようになる。それは非平衡定常状態から平衡状態を特徴付けることを意味しない。この欠点を考慮しマルコフ過程のplausibleなエントロピー生成量を論じたのはSchnakenberg<sup>11</sup>, Alexandrowicz<sup>12</sup>, Nakagomi<sup>13</sup>, Qian<sup>14</sup>である。中でもNakagomiはSchnakenbergのad hocな議論を開放系一般の枠組定式化として再構成し, またQianは不可逆循環(irreversible circulation)との関係を明らかにする定式化を提出した。簡単にSchnakenbergの議論<sup>11</sup>を見よう。

$$\frac{dP_i}{dt} = \sum_j (r_{ij} p_j - r_{ji} p_i) \quad (4)$$

に従うマルコフ鎖を考察し、これに対して定義される  $-\frac{d}{dt}K(p^t, \bar{p})$  を計算する：

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dt}K(p^t, \bar{p}) &= -\sum_i \frac{dp_i^t}{dt} \log \frac{p_i^t}{\bar{p}_i} = \sum_{i,j} r_{ij} p_j^t \log \frac{\bar{p}_i p_j^t}{p_i^t \bar{p}_j} \\ &\geq \sum_{i,j} r_{ij} p_j^t \left(1 - \frac{p_i^t \bar{p}_j}{p_i^t p_j^t}\right) \geq 0 \quad (\text{cf 不等式 } \log \frac{1}{x} \geq 1 - x). \end{aligned} \quad (5)$$

これはスタンダードなH-定理であり等号は  $p^t = \bar{p}$  のときのみ成り立つ。これに対し上の式の等式の最右辺に現れる量  $\sum_{i,j} r_{ij} p_j^t \log \frac{\bar{p}_i p_j^t}{p_i^t p_j^t}$  の  $\log$  の中を  $\frac{r_{ij} p_j^t}{r_{ji} p_i^t}$  で置き換えた式は  $\sum_{i,j} r_{ij} p_j^t \log \frac{r_{ij} p_j^t}{r_{ji} p_i^t} \geq \sum_{i,j} r_{ij} p_j^t \times \left(1 - \frac{r_{ji} p_i^t}{r_{ij} p_j^t}\right) = 0$  を満足する。Schnakenberg は  $p_i$  の発展方程式(4)の右辺に現れる量  $r_{ij} p_j - r_{ji} p_i$  を(確率の)流れ(flux)  $J_{ij}$  と定義しこれに対する‘force’を  $X_{ij} = \log \frac{r_{ij} p_j}{r_{ji} p_i}$  で定義するならば、次の表式がこのマルコフ鎖に属する「エントロピー生成」として適切なものであると論じた。

$$P(p) \equiv \sum_{(ij)} \frac{1}{2} J_{ij} X_{ij} = \sum_{i,j} r_{ij} p_j \log \frac{r_{ij} p_j}{r_{ji} p_i} \geq 0 \quad (6)$$

$$\text{この不等式において等号は } r_{ij} p_j = r_{ji} p_i \text{ (すべての } (i, j)\text{-pair に対し)} \quad (7)$$

のときに限り成立し、それは詳細均合(detailed balance)を意味する。マルコフ鎖の理論によれば、既約なマルコフ鎖において詳細均合が成立するのはユニークな定常状態に限り  $p_i = e^{-\phi_i}$  と表すことが出来る。従ってこれを  $p^e$  で表すならば(6)に対し

$$P(p) = 0 \leftrightarrow p = p^e \quad (8)$$

すなわちエントロピー生成が0となるのは  $p^e$  (平衡状態)に限ると主張してよからう。また、 $p \neq p^e$  に対しては  $P(p) = \sum_{i,j} r_{ij} p_j (\log r_{ij} p_j - \log r_{ji} p_i) > 0$  でこれは詳細均合からのはずれを意味するので Alexandrowicz<sup>12</sup> は  $P(p)$  を ‘detailed imbalance’ と呼んでいる。最後に(6)式と熱力学関係式(1)との対応をみよう：

$$P(p) = \sum_{i,j} r_{ij} p_j \log \frac{p_j}{p_i} - \sum_{i,j} r_{ij} p_j \log \frac{r_{ji}}{r_{ij}}$$

[右辺第一項] =  $-\frac{d}{dt} \sum_i p_i \log p_i$  を考察するならば、これは次のように書き換えられる

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= \sum_{i,j} p_i \left( r_{ji} \log \frac{r_{ij}}{r_{ji}} \right) + P(p) & P(p) &\equiv \frac{d_i S}{dt} \geq 0 \\ &= \frac{d_e S}{dt} + \frac{d_i S}{dt}; \quad \frac{d_e S}{dt} = \sum_j \langle r_{ji} \log \frac{r_{ij}}{r_{ji}} \rangle p_i \end{aligned} \quad (9)$$

ただし  $\langle \cdot \rangle_{p_i} \equiv \sum_i p_i (\cdot)$  は確率分布  $\{p_i\}$  に関する平均である。

この立場からすれば、マルコフ鎖であるこの系の環境との間でなされるエントロピー変化を示すのが  $\sum_j < r_{ji} \log \frac{r_{ij}}{r_{ji}} >$  でありマルコフ遷移  $i \rightarrow j$  に伴い単位時間あたり  $r_{ji} \log \frac{r_{ij}}{r_{ji}}$  のエントロピー変化がある。特に detailed balance(7)が平衡状態に対して成立するとき  $\frac{r_{ij}}{r_{ji}} = e^{\phi_j - \phi_i} = e^{\frac{1}{kT}(\epsilon_i - \epsilon_j)}$  (平衡分布がエネルギーの正準分布の場合)

$$\frac{d_e S}{dt} = \frac{1}{kT} \sum_j < r_{ji} (\epsilon_i - \epsilon_j) >_{p_i} \equiv \frac{1}{kT} \frac{dQ}{dt} \quad (10)$$

すなわちこの系が外界に放出する熱エネルギーに伴うエントロピー変化を示す。マスター方程式(4)のこのような熱力学解釈を与えたのはNakagomi<sup>13</sup>であり、Schnakenbergの提案を mesoscopic thermodynamic model の名称で統一的にまとめた。ここで用いた 'mesoscopic' という語は対象系である力学系について確率分布  $\{p_i\}$  による微視的記述また環境(又は熱浴)についてわずかな熱力学変数だけの巨視的記述を適用するという micro と macro の中間的な立場を表明するものである。

#### §4. Lebowitz 多熱浴開放系のモデル

確率分布が定義された対象系の動力学をマルコフ過程として与える立場ではかなり一般的にしかも簡明に熱力学法則(第一法則および(1)を一般化した第二法則)を構成することが出来る。これはLebowitz<sup>15</sup>が1950年代にすでに定式化を行っていたもので、1970年代量子論的なマルコフ過程すなわち3.1で略述した完全正值写像としての半群 — 量子動力学半群 (quantum dynamical semigroup) — が確立したことによりSpohn-Lebowitz<sup>16</sup>によって1978年再定式化された。筆者ら<sup>17</sup>はこのモデルがレーザー現象にとって極めて都合よいものであることを知り、これを用いて非線形光学の熱力学を論じた。エントロピー生成の問題のみならず自己組織化の簡単な実例という意味から以下に紹介する。Lebowitzのモデルとは§3の最後に示した熱力学への橋渡しを対象系の接する熱浴が複数個ある場合に拡張するとともに外場の作用としての '仕事' を取り入れることを可能にしたものであって以下のように示される(文献17参照):

密度行列  $\rho$  (classicalでは確率分布  $p$ , 以下は quantum で記述) の対象系はマルコフ型時間発展の generator  $L$  の運動方程式に従うが、その  $L$  は

$$\frac{d\rho}{dt} = L\rho ; L = L_0 + \sum_{i=1}^r L_i$$

$$L_0(\cdot) = i[\cdot, \bar{H}] \quad (\text{ハミルトニアン } \bar{H} \text{ は一般に外場を含む})$$

$$L_i(\cdot) = \text{dissipative generator with detailed balance}^{18}$$

$$L_i \rho_i^e = 0 \quad \rho_i^e = e^{-\beta_i (H - \psi_i)} \quad (11)$$

のように一般に、外場の作用を含むハミルトニアン部分および異なる温度  $\beta_i^{-1}$  の熱浴に接近を許す複数の散逸的な generator の和からなる。この系に対し次の熱力学関係式が成り立つ。

第I法則  $dE = \delta W + \sum_{i=1}^r \delta Q_i$

第II法則  $dS = \sum_{i=1}^r \frac{1}{kT_i} \delta Q_i + \sigma(\rho) dt, \quad \sigma(\rho) \geq 0$

但し  $dE = \langle L^* H \rangle_\rho dt$ ,  $dS = \langle L^* (-\log \rho) \rangle_\rho dt$ ,  $\delta W = \langle L_0^* H \rangle_\rho dt$ ,  $\delta Q_i = \langle L_i^* H \rangle_\rho dt$

$$\langle L^* X \rangle_\rho \equiv \text{Tr} (L \rho) X \quad (L^* \text{は } L \text{の共役 generator}) \quad (12)$$

全微分  $d$  と部分微分  $\delta$  との区別は total generator  $L$  による時間変化かそうでないかの区別による。

上に得た第 II 法則の形式はマルコフ鎖に対する結果(9)の拡張になっており、(1)との対比は

$$d_e S = \sum_{i=1}^r \frac{1}{kT_i} \delta Q_i, \quad d_i S = \sigma(\rho) dt \quad (13)$$

すなわち  $\sigma(\rho)$  がエントロピー生成  $p$  を表わし、今の場合

$$\sigma(\rho) = \sum_{i=1}^r \langle L_i^* (\log \rho_i^e - \log \rho) \rangle \geq 0 \quad (14)$$

このエントロピー生成  $\sigma(\rho)$  は(14)とともに

$$\sigma(\rho) = 0 \text{ は } \bar{H} = H \text{ かつ } \beta_1 = \beta_2 = \dots = \beta_r, \rho = \rho^e \text{ のみ成立。} \quad (15)$$

すなわち Prigogine の axiom I を正しく反映したものとなっている。

また、上の結果は古典的な連続マルコフ過程すなわち  $L$  が Fokker-Planck operator で表される場合にもそのまま適用される：テンソル記法を用い

$$L_0 p = -\frac{\partial}{\partial x_\nu} (v_\nu(x) p) \quad (\text{div } \mathbf{v} = 0), \quad L_i p = \frac{\partial}{\partial x_\mu} (D_{\mu\nu}^{(i)}(x) p(x) \frac{\partial}{\partial x_\nu} \log \frac{p(x)}{p_i^e(x)}) \quad (16)$$

このとき

$$0 \leq \sigma(p) = \sum_{i=1}^r \int D_{\mu\nu}^{(i)}(x) \left( \frac{\partial}{\partial x_\mu} \log \frac{p(x)}{p_i^e(x)} \right) \left( \frac{\partial}{\partial x_\nu} \log \frac{p(x)}{p_i^e(x)} \right) p(x) dx \quad (17)$$

で  $\sigma(p) = 0$  は  $p_1^e(x) = p_2^e(x) = \dots = p(x)$  の場合に限る。(16)で  $\text{div } \mathbf{v} = 0$  の条件があれば  $L_0$  は  $\sigma(p)$  に直接寄与しない。外場の効果は  $\sigma(p)$  を通して間接的に現れる。

もっとも簡単なレーザー発振の理論は次のようなものである：空洞共振器内の二準位原子系に対して準位間に共鳴する電磁波モードの増殖を確率過程としてとらえると、このモードのフォトン数が対象系でこれに二種類の温度の異なる熱浴が接触する。一つは空洞の壁で外界と等しい温度、他の一つは二準位原子系でポンピングによりその分布の温度は増大し逆転分布にまで達する。従って Lebowitz モデルで言えば二熱浴開放系ということになる。Fokker-Planck 方程式による記述<sup>17</sup>では一般式(16)において

$$L_0 = 0 \text{ (外場なし)}, \quad L_1 = L_C = \frac{\partial}{\partial n} \left[ C n_C n \left( \frac{1}{n_C} + \frac{\partial}{\partial n} \right) \cdot \right] \quad (18a)$$

$$L_2 = L_A = \frac{\partial}{\partial n} \left[ \frac{|A n_A| n}{1 + s n} \left( \frac{1}{n_A} + \frac{\partial}{\partial n} \right) \cdot \right] \quad (18b)$$

のように発振モード・フォトン数  $n$  を連続変数とみなす Fokker-Planck operator で具体化される。

$n_C$  = 外界の温度からきまる熱フォトン数

$n_A$  = 原子二準位の分布によって定まる実行光子数 (ポンピング・パラメタ  $|A|$  の増大により可変で分布反転の結果負の値を取る)

定常状態における光子数  $n$  の分布は  $(L_C + L_A) p = 0$  の解であるが、それはポンピングの程度により著しく異り、 $\bar{n} < 1$  (熱光子) から  $\bar{n} \gg 1$  (発振) へと重心がシフトする。そのようなレーザー一定常発振分布は非常によく近似で  $n$  に関するガウス分布  $\text{const.} \times \exp \left[ -\frac{sC}{2|A|(n_C + |n_A|)} (n - n_C)^2 \right]$  で表されることが知られている。<sup>19</sup>  $n = a^* a$  のように複素  $a$ -平面上では原点を中心とする半径  $\sqrt{n_C}$  の輪環上にピークをもつ分布となる。また、 $e^{-\frac{n}{n_C}}$  の熱光子分布が反転分布した原子系との接触により急速にこの分布に転化する様子は time-dependent Fokker-Planck 方程式の問題として扱われているが、中間に高いゆらぎの発生する段階をへて再び沈静化したガウス分布を生ずる状況は「自己組織化 (self-organization)」の簡単な典型例と考えられた。<sup>20</sup> 熱力学則にあてはめた結果は次のようになる。 $\delta W = 0$  として

$$\begin{aligned} \text{第 I 法則} \quad dE &= \delta Q_C + \delta Q_A \\ \text{第 II 法則} \quad dS &> \frac{\delta Q_C}{k\bar{T}_C} + \frac{\delta Q_A}{k\bar{T}_A} \quad \begin{aligned} k\bar{T}_C &= \hbar \omega n_C \\ k\bar{T}_A &= \hbar \omega n_A (< 0) \end{aligned} \end{aligned}$$

定常 (発振) 状態では  $dE = dS = 0$  で第二法則は  $(\frac{1}{k\bar{T}_C} - \frac{1}{k\bar{T}_A}) \delta Q_C < 0$  と書かれるから、 $\bar{T}_A < 0$  を考慮し  $\delta Q_C = -\delta Q_A < 0$ 。これは発振モードが原子系より熱エネルギーを獲得し外界へ放出するという熱機関の役割を示すものである。

上と同じレベルで論ずることの出来る非線形光学系の熱力学の他の例に光学二重安定性の問題で、原子系のポンピングを伴わず強い外電場のもとでの非線形光吸収を扱う。<sup>17</sup> ここで興味を生ずるのは非線形レスポンスを正しく定式化出来るかという問題で、非線形 Onsager 関係式とそれに基くエントロピー生成の問題であり (§2 筆者補注参照)、(一般論として次節で説明しよう。なお、ここで述べた非線形光学系の Fokker-Planck 方程式の取り扱いには、モードと原子自由度とを同等に扱う Langevin 方程式とそれから原子自由度を消去する粗視化の問題があるが割愛している (詳しくは 17 および 21 参照))

## §5. Onsager-Machlup 理論の非線形化問題

非平衡熱力学を確率過程として定式化する一つのアプローチは Onsager-Machlup 理論<sup>5</sup> に見ることが出来る。この理論は線形ガウス過程に限定してではあるが (Onsager が散逸極小 (least dissipation) と呼んだ) エントロピー生成極小原理を明快に基礎付けているので、これを非線形の場合に拡張すればよいと誰しも考える。1970 年代中頃そのような研究が続出しているが、完成はしていない。例えば、非線形の Onsager 関係がどう与えられるかそれがエントロピー生成とどう関係しているかをはっきり示したものは無いと思われる (個々の研究を調べてはいないしここでそうする余裕はないが)。O-M はもっとも簡単な線形減衰  $\dot{x} = -rx$  を Langevin 方程式  $\dot{x} = -rx + R(t)$  の平均結果と考え、その定常分布  $p_0(x) \propto e^{-\frac{r}{2L}x^2}$  における Onsager 関係式  $\dot{x} = LX$  ( $X = \frac{\partial}{\partial x} \log p_0(x)$ ) を一つの散逸的力学の Lagrange

## 変分原理

$$\delta \int_{t_0}^{t_1} L(\dot{x}, x) dt = 0, \quad L(\dot{x}, x) = \frac{1}{4L} (\dot{x} + r x)^2 \quad (19)$$

の結果としてとらえた。上の変分原理の結果は  $\ddot{x} = r^2 x$  であり, forward damping  $\dot{x} = -r x$  と backward damping  $\dot{x} = r x$  とが同時に含まれているが, その確率過程としての意義は二時刻  $t_0, t_1$  における  $x(t)$  の確定値  $x^{(0)}, x^{(1)}$  をつなぐ軌道はこの二つの解の線形結合でありその軌道に沿う作用積分  $\int_{t_0}^{t_1} L(\dot{x}(t), x(t)) dt$  がマルコフ遷移確率の対数を与えている:

$$\log P(x^{(1)} t_1 | x^{(0)} t_0) + \text{const (indep. of } x^{(1)}, x^{(0)}) = - \int_{t_0}^{t_1} L(\dot{x}(t), x(t)) dt \quad (20)$$

定常不可逆過程は時間に関する境界条件  $t_1$  を自由とし  $t_1 \rightarrow \infty$  で収束する成分を取り出したものでそれが forward damping  $\dot{x} = -r x$  かつ不可逆関係式  $= DX$  を与える。(全く対称に  $t_0$  を自由とし  $t_0 \rightarrow -\infty$  で収束する成分を取り出せば  $\dot{x} = r x = -DX$  が得られる。O-M はこれを 'mirror-image' と呼んだ。) そのような定常過程に対する Lagrange 変分原理は次のような変形のもとに散逸極小原理となる:

$$\log P(x^{(1)} t_1 | x^{(0)} t_0) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_1} [X \dot{x} - (\Phi(\dot{x}) + \Psi(X))]_{\max(\dot{x})} dt + \text{const} \quad (21)$$

ただし  $\Phi(\dot{x}) = \frac{1}{2L} \dot{x}^2$ ,  $\Psi(X) = \frac{1}{2} L X^2$  で定常過程が実現する以前の段階(すなわち変分を取る以前)では  $\dot{x}$  と  $X$  とは独立な変数と考え, 変分は flux  $\dot{x} (= J)$  に関し行われるものとする。そして, 定常過程が実現する状況では積分の各時刻において maximization がなされるとして,  $X \dot{x} - \Phi(\dot{x}) = \max(\dot{x})$  をもって散逸極小原理が得られる ( $\rightarrow \dot{x} = LX$ : Onsager 関係式)。線形不可逆過程がガウス過程として関係付けられることは O-M とは独立に Hashitsume<sup>22</sup> によっても論ぜられていた。一般の(非線形ドリフトを許す) Fokker-Planck 方程式で記述される過程(すなわち拡散過程)に対し同様な定式化が出来ないであろうか。筆者の考え<sup>2</sup>は次の通りである。(複数の変数を想定しテンソル記法を用いる。)

平均運動が  $\dot{x}_\mu = v_\mu(\mathbf{x})$  で与えられる拡散過程の O-M Lagrangian は

$$L(\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}) = \frac{1}{4} L_{\mu\nu}^{-1} (\dot{x}_\mu - v_\mu) (\dot{x}_\nu - v_\nu) + \frac{1}{2} \frac{\partial v_\mu}{\partial x_\nu}, \quad L_{\mu\nu} = L_{\nu\mu} \quad (22)$$

である。  $L_{\mu\nu}$  は上の運動を Langevin 方程式に従うとしたときのランダム力の相関の強さに関係し, 一般には座標  $\mathbf{x}$  の関数であってよい。(21)に相当する変分対象の方程式を導くのはかなり面倒でここでくわしく説明出来ないが, 一言で言えば拡散過程に関する H-定理の積分である一つの恒等式に「最確軌道」の概念を入れて得られる:

$$\Phi(\dot{\mathbf{x}}) = \frac{1}{2} L_{\mu\nu}^{-1} (\dot{x}_\mu - (v_\mu - v_\mu^0)) (\dot{x}_\nu - (v_\nu - v_\nu^0)), \quad \Psi(\mathbf{X}) = \frac{1}{2} L_{\mu\nu} X_\mu X_\nu$$

$$\text{ただし } v_\mu^0(\mathbf{x}) = L_{\mu\nu}(\mathbf{x}) X_\nu, \quad X_\nu = \frac{\partial}{\partial x_\nu} \log p_0(\mathbf{x}) \quad (p_0(\mathbf{x}) = \text{定常分布}) \quad (23)$$

この最後の関係は座標変数  $\mathbf{x}$  を force  $\mathbf{X}$  に変換する規則を与え, また最大値原理は Onsager 関係式として  $\dot{x}_\mu = v_\mu(\mathbf{x}(\mathbf{X}))$  を許し, その結果  $\Phi(\dot{\mathbf{x}}) + \Psi(\mathbf{X}) = 2\Psi(\mathbf{X})$  がエントロピー生成を与えることになる

のである。

以上をまとめ、分布がFokker-Planck方程式  $\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_\mu} (-v_\mu p) + \frac{\partial}{\partial x_\mu} (L_{\mu\nu} \frac{\partial p}{\partial x_\nu})$  の解である系の熱力学的性質に関し次のことが云える注：

1. ドリフト速度  $\mathbf{v}(\mathbf{x})$  および拡散係数  $L(\mathbf{x}) (> 0)$  が与えられた一般の拡散過程において、その定常分布  $p_0(\mathbf{x})$  から定義される熱力学力  $\mathbf{X} = \nabla \log p_0(\mathbf{x})$  を用い、Onsager 関係式は  $\mathbf{J} = \mathbf{v} \{ \mathbf{x}(\mathbf{X}) \}$  で定められる。それは散逸極小

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{X} - \phi(\mathbf{J}, \mathbf{X}) = \max(\mathbf{J}) \quad (24)$$

但し  $\phi(\mathbf{J}, \mathbf{X}) = \frac{1}{2} L^{-1}(\mathbf{J} - (\mathbf{v} - \mathbf{v}^0))(\mathbf{J} - (\mathbf{v} - \mathbf{v}^0))$ ,  $\mathbf{v}^0 \equiv L\mathbf{X}$  ( $\phi$  の  $\mathbf{X}$  依存性は  $L, \mathbf{v}$ , の  $\mathbf{x}$  依存性:  $\mathbf{X} = \nabla \log p_0(\mathbf{x})$  から生ずる), の結果であり, それを  $\phi + \psi$  に代入した量  $\phi(\mathbf{v}, \mathbf{X}) + \psi(\mathbf{X}) = 2\psi(\mathbf{X}) = (L\mathbf{X}) \cdot \mathbf{X}$  は次の意味でエントロピー生成を与える:

$$p(x^{(1)} t_1 | x^{(0)} t_0) = \text{const} \times \left( \frac{p_0(x^{(1)})}{p_0(x^{(0)})} \right)^{1/2} e^{-(t_1 - t_0)(LX) \times 2} \quad (25)$$

2. potential 条件  $\nabla \times L^{-1}\mathbf{v} = 0$  ( $\frac{\partial}{\partial x_\nu} (L^{-1}\mathbf{v})_\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu} (L^{-1}\mathbf{v})_\nu$ ) (26)

が成立する場合  $\mathbf{v} = \mathbf{v}^0$  で Onsager 関係式は通常の形式  $\mathbf{J} = L\mathbf{X}$  となり (拡散係数  $L$  が定数なる限り, これは線形不可逆過程と同一形式であるがそれは必ずしもガウス過程を意味しない), 非線形性は  $L(\mathbf{x}(\mathbf{X}))$  を通じてのみ生ずる。

ポテンシャル条件のある拡散過程とは, 過程が時間反転を許すことを意味しマルコフ鎖の詳細均合の条件に相当して定常分布が  $p_0(\mathbf{x}) = \text{const} e^{\int \mathbf{x} L^{-1} \mathbf{v} d\mathbf{x}}$  のように求積で求められる場合である (広義の熱平衡)。それは Onsager の相反定理が成立することと同等であると考えられるが, その意味では §2 の補注で述べた一柳氏の提案とは  $L = \text{定数}$  を別として一般に一致しない。なお, この条件が成立するとき,  $\langle \mathbf{J} \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} \rangle_p < 0$  と Glansdorff-Prigogine の時間発展規準の成立することが示されるが, これは一般に  $\frac{d}{dt} \langle \mathbf{J} \cdot \mathbf{X} \rangle_p < 0$  を意味しない。実際レーザー発振分布への移行に際し激しいゆらぎの発生に伴って  $\frac{d}{dt} \langle \mathbf{J} \cdot \mathbf{X} \rangle_p > 0$  となることを確かめている。<sup>24</sup>

## §6. 種々の問題点

6.1. 非線形 Onsager-Machlup 理論の基礎 前節最後に述べたことは筆者の考えであり, 一般に承認されたものではない。これを確実なものとするのは確率過程論の一課題となる。その場合の興味ある問題は, 確率過程を時間の一方方向だけの過程としてではなく逆方向の過程を同時に取り入れる '力学' として定式化することであり, それは O-M Lagrangian が出発点となっていることから明瞭である。この構造は Nelson<sup>25</sup> が始めた確率量子化のための「確率力学 (stochastic mechanics)」と密接な類似性をもって

---

注. 少なくともポテンシャル条件の成立する場合確実であろう。そうでない場合, 所謂 circulation に伴うエントロピー生成がどうなるか, については問題がある (§6 参照)。

いて、Yasue<sup>26</sup>が提案した確率変分法により表現することが出来る。<sup>27</sup>しかしながら、「エントロピー生成」という熱力学概念に到達する部分においては、概念上解消出来ていない問題点が幾つも残っている。理解の深化を必要とする基本的な問題は、Onsagerが提出した「散逸極小」概念とPrigogineの発想である「エントロピー生成極小」概念の相互関係である。(線形不可逆過程では、 $\mathbf{J} \cdot \mathbf{X} - \Phi(\mathbf{J}) = \max(\mathbf{J})$ がOnsager関係 $\mathbf{J} = \mathbf{L}\mathbf{X}$ を定め、その結果の $2\Phi(\mathbf{J}(\mathbf{X})) = (\mathbf{L}\mathbf{X})\mathbf{X}$ がエントロピー生成を与えた。Prigogineはこれを逆にとらえ、Onsager関係 $\mathbf{J} = \mathbf{L}\mathbf{X}$ をgivenとし、これを附加条件とする変分原理 $\mathbf{J} \cdot \mathbf{X} = \min$ が非平衡定常状態を定めるとした。この関係が非線形の定式化に維持されるのかどうか、一柳氏の提案(§2の補注)が回答になる筈である(後記参照)。

6.2. 情報量的エントロピー生成とOnsager-Machlup理論との関係 中国女性プロバビリスト銭敏平(Qian Minping)<sup>28</sup>はマルコフ鎖に関するSchnakenberg-Alexandrowicz-Nakagomiのエントロピー生成(6)がpath-space上に定義されたプラス過程の分布のマイナス過程(time-reversed process)の分布に対する相対エントロピーから導かれると論じ、それを拡散過程に適用して $\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_\mu}(-v_\mu p) + \frac{\partial}{\partial x_\mu}(L_{\mu\nu} \frac{\partial p}{\partial x_\nu})$ に関し

$$P(p) = \int L_{\mu\nu} \left( \frac{\partial}{\partial x_\mu} \log p - (L^{-1}v)_\mu \right) \left( \frac{\partial}{\partial x_\nu} \log p - (L^{-1}v)_\nu \right) p dx \quad (27)$$

を得た。 $P(p) \geq 0$ で、等号はポテンシャル条件の成立する場合の‘広義’の平衡分布 $p^e(x) \propto e^{\int^x L^{-1}v dx}$ に限られる。これはマルコフ過程一般にエントロピー生成概念を統一的に定義出来る可能性を示したものと示唆的である。直ちに考えられることは量子論的に拡張する問題で、量子動力学半群に関しエントロピー生成の同様な表現を得、それが0となる条件と量子的詳細均合<sup>18</sup>との同等性を示すことが出来た。<sup>29</sup>しかしながら、(量子論の場合とはもかく)表式(27)と前述のOnsager-Machlup理論との関係が明らかでない。(ポテンシャル条件又は詳細均合がある場合については両者の間に矛盾はないが、そうでない場合「不可逆循環irreversible circulation」のエントロピー生成への寄与についての理解が不十分である。)

6.3. 情報量的エントロピー生成の基本問題 上述の研究(Nakagomi, Qianら)により、マルコフ過程一般でこのエントロピー生成概念が非平衡状態を特徴付ける基本量として次第に定着化する方向にあると云える。これがPrigogineのaxiom I, II, III(又はIII')にどこまで迫ることが出来るであろうか?元来熱平衡状態を特徴付けるというテーマは統計力学基礎論の問題として取り上げられ、例えば‘変分原理とKMS状態との同等性’のように数理物理の定式化から回答されているが、ここでは非平衡状態(限定はされているが)の中から特徴付けるという発想にこの課題の重要性がある。その場合、詳細均合或いはポテンシャル条件の成立することをもって平衡状態と割り切れるかどうか疑問が残る。エントロピー生成極小原理(II)はこの立場からすれば、例えば表式(27)に関する何らかの変分原理が定常分布 $\frac{\partial}{\partial x_\mu}(-v_\mu p_0) + \frac{\partial}{\partial x_\mu}(L_{\mu\nu} \frac{\partial p_0}{\partial x_\nu}) = 0$ を確保するものとなるべきである(文献17におけるこれに関する議論を参照)。

6.4. 外場によって誘起されるエントロピー生成——レスポンス理論のエントロピー生成概念 線形応答理論(Kubo理論)<sup>30</sup>においては、応答係数を算出する手法が密度行列に関するハミルトニアン・ダイナミクスで一貫されている。それはエントロピー生成をどう取り出しているのであろうか?一柳氏の所論(本稿に続く)に一定の回答を見出すことが出来る。小嶋氏によれば、von Neumann代数の相対エント

## 研究会報告

ロピーの概念を用いて一般的に定式化出来るものである(一柳・小嶋・長谷川で準備中)。

## 文 献

1. S. R. de Groot and P. Mazur, *Non-equilibrium Thermodynamics* (North-Holland Pub. Co. Amsterdam, 1962).
2. P. Glanodorff and I. Prigogine, *Thermodynamic Theory of Structure, Stability and Fluctuations* (J. Wiley & Son, 1971); cf. G. Nicolis and I. Prigogine *Self-organization in Nonequilibrium Systems* (J. Wiley & Son, 1977).
3. Glansdorff-Prigogineの主要なオリジナル論文(種々の形式で I, II, III が述べられている) *Physica* **20** (1954) 773; *Physica* **30** (1964) 351; *Physica* **31** (1965) 1242; *Physica* **46** (1970) 344; *Physics of Fluids* (1962) 144.
4. L. Onsager, *Phys. Rev.* **37** (1931) 405; *Phys. Rev.* **38** (1931) 2265.
5. L. Onsager and S. Machlup, *Phys. Rev.* **91** (1953) 1505.
6. 梅垣寿春・大矢雅則, 「確率論的エントロピー」, 「量子論的エントロピー」(情報科学講座 A2-6 および A2-7, 共立出版 1983 および 1974)。
7. G. Lindblad, *Nonequilibrium entropy and irreversibility* (Mathematical physics studies: V. 5 D. Reidel Pub. Co. 1983)。
8. M. S. Green, *J. Chem. Phys.* **20** (1952) 1281.
9. H. Spohn, *J. Math. Phys.* **19** (1978) 1227.
10. F. Schlögl, *Ann. Phys.* **45** (1967) 155.
11. J. Schnakenberg, *Rev. Mod. Phys.* **48** (1976) 571.
12. Z. Alexandrowicz, *J. Stat. Phys.* **16** (1977) 139.
13. T. Nakagomi, *J. Stat. Phys.* **26** (1981) 567.
14. Qian Minping and Qian Min, *Z. Wahrscheinlichkeitstheorie* **59** (1982) 203.
15. J. L. Lebowitz, *Phys. Rev.* **114** (1959) 1192; related papers *Phys. Rev.* **99** (1955) 578; *Phys. Rev.* **128** (1962) 1945.
16. H. Spohn and J. L. Lebowitz, *Adv. Chem. Phys.* **38** (1978) 109.
17. H. Hasegawa, T. Nakagomi, M. Mabuchi and K. Kondo, *J. Stat. Phys.* **23** (1980) 281.
18. 量子力学的な dissipative generator の典型は  $L\rho = [V, \rho V^*] + [V\rho, V^*]$  の線形結合であり, それが detailed balance の条件を満たすのは  $e^{itH} V e^{-itH} = e^{i\omega t} V$  のように各  $V$  がハイゼンベルグ時間発展(modular automorphism)の固有ベクトルになっている場合である。このとき  $\rho_\beta^c V \rho_\beta^{c-1} = e^{-\beta\omega} V$  が量子論的詳細均合を表す。完全正值な量子動力学半群の generator を上の形に論じたのは Lindblad (*Comm. Math. Phys.* **48** (1976) 119) であり, それに detailed balance の条件を加えたのは Kossakowski, Frigeris, Gorini, Verri (*Comm. Math. Phys.* **57** (1977) 97) である。
19. M. Sargent, M. O. Scully and W. E. Lamb, *Laser Physics* (Addison-Wesley, London

1974)

20. H. Haken, *Synergetics-An Introduction* (Springer-Verlag, Berlin 1978).
21. H. Hasegawa, *Thermodynamics and Transient Dynamics of Simple Optical Systems with Instability* Springer Series in Solid-state Sciences **18** (Springer Verlag 1980); H. Hasegawa, M. Mizuno and M. Mabuchi, Prog. Theor. Phys. **67** (1982) 98.
22. N. Hashitsume, Prog. Theor. Phys. **8** (1952) 461.
23. H. Hasegawa, Prog. Theor. Phys. **56** (1976) 44.
24. H. Hasegawa, Prog. Theor. Phys. **57** (1977) 1523; H. Hasegawa, M. Mabuchi and S. Sawada, Proc. 4th Rochester Conf. on Coherence and Quantum Optics, Rochester (1977) Plenum (1978) 667.
25. E. Nelson, *Dynamical theories of brownian motion* (Princeton University Press 1967).
26. K. Yasue, J. Funct. Anal. **41** (1981) 327.
27. H. Hasegawa, Phys. Rev. D **33** (1986) 2508.
28. Qian, Minping, *The Entropy Production and Reversibility of Markov Processes* preprint for Intern. Conf. Probability Theory 1985 Nagoya.
29. T. Nakagomi and H. Hasegawa, unpublished.
30. R. Kubo and N. Hashitsume, *Statistical Physics*, (Springer 1985).

## 後 記

1. Onsager-MachLup 理論に現れる二種の散逸関数  $\Phi(J)$  と  $\Psi(X)$  とは Legendre 変換によって変数  $J$  から変数  $X$  に移れることが散逸極小原理とエントロピー極小原理との間の関係を与える。これを非線形の場合に拡張しようという一柳氏の提案は中野藤生氏のアイディアである(私信および中野氏のプレプリント)。しかし筆者の理解する限り、それは確率過程の理論から導かれるものではないようである。
2. この報告を書いたのち、他のもう一つの研究会「カオスとその周辺」が催された。散逸系のカオスにおいては 'strange attractor' の測度に対する変分原理が確立していて、最近の高橋陽一郎氏の研究によれば、それは熱平衡状態に関する Gibbs の変分原理と同様な形式で書かれる。しかし、散逸系カオスの strange attractor が非平衡系の基本的定常状態であるということから、むしろそれは Onsager の散逸極小原理に対応するものではないかと思われる。今後の解明が期待される問題点の一つであろう。

## 場の理論における断熱定理と非平衡熱力学

慶大・理工 福田 礼次郎

熱的に isolate されたマクロな系の Hamiltonian を